

## Příloha 6: Posudek oponenta habilitační práce

**Masarykova univerzita**

**Fakulta** Přírodovědecká fakulta MU

**Habilitační obor** Fyzikální chemie

**Uchazeč** Mgr. Markéta Munzarová, Dr. rer. nat.

**Pracoviště** Přírodovědecká fakulta MU

**Habilitační práce** Relationships between Structure and Magnetic Properties in Biomolecules, Inorganic, and Bioinorganic Systems

**Oponent** prof. RNDr. Petr Bouř, DSc.

**Pracoviště** Ústav organické chemie a biochemie AVČR, Praha

Dr. Markéta Munzarová předkládá k habilitaci soubor vysoce kvalitních výpočetních studií zaměřených na modelování související s EPR a NMR spektroskopií. Jedná se o aktuální téma, jehož rozvoj posouvá možnosti experimentálních technik a teoretických simulací. Podrobné porozumění chování molekul může v budoucnu např. usnadnit vývoj nových biologicky aktivních látek. V práci jsou tvořivě použity moderní postupy kvantové a molekulové mechaniky, často v poslední době označované jako "multiscale", tj. kombinace více výpočetních metod nutná při modelování složitějších systémů.

Habilitační práce dokazuje, že autorka se v tématu velice dobře orientuje a je schopná dlouhodobé koncepční práce. Jen kladně lze také hodnotit navazování spoluprací s ostatními špičkovými laboratořemi, a předávání zkušeností studentům a doktorandům.

Jedním z hlavních přínosů je např. vypracování vhodných modelů pro simulace magnetických parametrů nukleových kyselin, což často zahrnuje pracné zpracovávání rozsáhlých výpočetních dat, ovšem evidentně vede k hlubokému porozumění spektrálním i jiných fyzikálně-chemických vlastnostem těchto biologických komponent. Práce a přiložené články dokazují, že Dr. Munzarová se spolu s ostatními autory nespokojí s provedením výpočtů, ale je schopna je detailně analyzovat a konfrontovat s experimentálními daty.

Práce je logicky členěná a mimo českého úvodu je psána dobrou angličtinou se zanedbatelným množstvím gramatických a stylistických chyb ("systems" s velkým S v nadpisu, str. 8 then→than, str. 14 faint → fine ...).

Jako obecný čtenář ovšem vytýkám některé vágní formulace, nevysvětlování zkratk a zejména symbolů v rovnicích. Některé věci by se daly prezentovat s větším nadhledem, např. ve dvou větách vysvětlit co to "DFT" je, že pro magnetické vlastnosti má některé výhody, ale i nevýhody, v závěru trochu chybí výhled do budoucna. To mě také inspirovalo k níže uvedeným dotazům.

Přes tyto drobnosti velký záběr práce, poctivé zpracování, a dobré výsledky dokazují, že autorka prokázala schopnost tvořivé vědecké a pedagogické práce. Její habilitační práce tak splňuje požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Fyzikální chemie.

### **Dotazy oponenta k obhajobě habilitační práce (počet dotazů dle zvážení oponenta)**

1. Obvykle se za "zlatý standard" ve výpočetní chemii označuje přístup coupled cluster, např. CCSD(T). Jaký vztah k tomu má Vámi použitá metoda DDCI (v kapitole B6)?
2. Jaký je v současnosti největší problém omezující simulace NMR parametrů, např. nukleových kyselin? Je to nepřesnost DFT funkciónálů, špatný model rozpouštědla, vibrační průměrování, apod.?

### **Závěr**

Habilitační práce Markéty Munzarové „Relationships between Structure and Magnetic Properties in Biomolecules, Inorganic, and Bioinorganic Systems“ *splňuje* požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Fyzikální chemie..

Praha, 6. prosince 2013